

Termes Spectroscopiques (Hollas p.175)

* Une fois qu'on a trouvé les "orbitales atomiques", on peut avoir les niveaux des orbitales dans lesquels sont les e^-

- Ça nous donne des infos sur la réactivité mais pas sur la Spectroscopie (les transitions entre niveaux d'énergie)

* On peut prendre en compte d'autres interactions par avoir d'autres levées de dégénérescence.

- Couplage Spin-Orbite, effet Zeeman, effet Stark

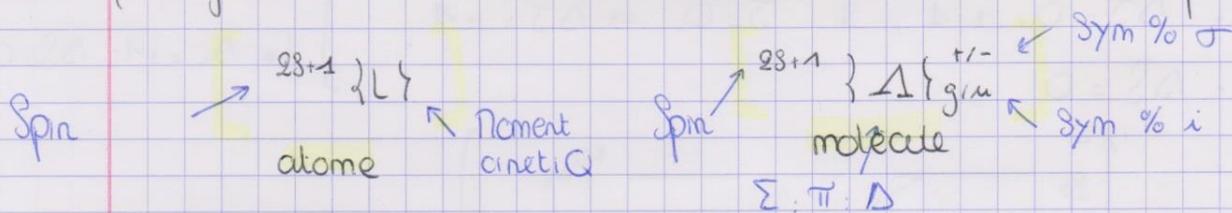
⇒ * Ce qui est important en Spectroscopie c'est que pour une même configuration électronique, on peut avoir différents termes Spectroscopiques (état énergétique par un atome/molécule)

* Pour définir les niveaux d'énergie des atomes, on utilise des nouveaux nombres quantiques :

$$L = \sum_i l_i \quad S = \sum_i s_i \quad \Rightarrow \text{Deg} = (2L+1)(2S+1)$$

↳ La Spectroscopie se base sur la conservation du moment cinétique L .

* La quantification des niveaux électroniques amène à des termes Spectroscopiques



* Pour les déterminer on utilise les tables de Slater

↳ cf "Table de Slater"

• On peut ajouter le couplage spin-orbite par lever la dégénérescence

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \Rightarrow |L-S| \leq J \leq |L+S|$$

⇒ On obtient les états spectroscopiques : $^{2S+1}L_J$ Deg = (2J+1)

• Par configuration en np^2

$$L \rightarrow {}^1D_2 - {}^3P_0 - {}^3P_1 - {}^3P_2 - {}^1S_0$$

• Le fondamental est l'état, avec les règles de Hund

- S le plus grand
- L le plus grand
- J le plus petit par une couche moins qu'à moitié remplie

⚠ On ne connaît que le fondamental pas les autres niveaux

* Les termes spectroscopiques donnent les transitions électroniques

↳ les seuls par les atomes

↳ On a aussi rotation et vibration par les molécules

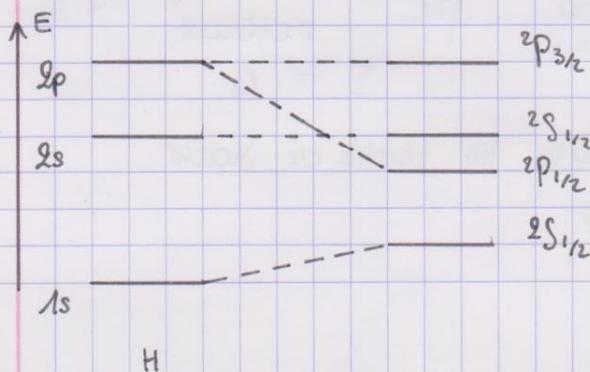
* Les transitions entre états respectent les règles que la partie

• $\Delta L = 0, \pm 1$, si $L=0 \Rightarrow \Delta L = +1$.

• $\Delta J = 0, \pm 1$, si $J=0 \Rightarrow \Delta J = +1$

• $\Delta S = 0$

⚠ Pas par H
↳ $\Delta L = \pm 1, \Delta S = 0$ ⚠



cf = Termes spectro H'